

# CdTe(111)表面电子态及其 H 吸附的电子结构研究

张海峰

(中国科学技术大学材料科学系 合肥 230026)

李永平 方容川

(中国科学技术大学物理系 结构分析开放研究实验室 合肥 230026)

**摘要** 本文利用自洽 Muffin-Tin 轨道线性组(LMTO—ASA)方法,采用 Slab 模型,研究了 CdTe(111)两类模型四种表面的 H 吸附电子结构,系统分析比较了 H 吸附对四种表面电子结构的影响,为研究 CdTe(111)表面金属吸附的电子结构作了准备.

**PACC:** 7320

CdTe 是一种宽禁带半导体,可用来制造 X-射线及  $\gamma$  射线探测器,太阳能电池或与其它材料组成异质结做红外探测器等等<sup>[1-6]</sup>,引起了实验和理论工作者的广泛兴趣.材料的表、界面直接影响材料的各种物理性质(如光学、电学、热学、力学等),是人们实际应用中十分关注的问题,继 Si 及 III-V 族化合物半导体表面及其吸附、界面问题广泛研究之后,II-VI 族化合物的表、界面及其吸附也成了半导体材料的研究热点<sup>[7]</sup>.CdTe 是 II-VI 族化合物中有代表性的半导体材料,在材料研究和器件应用中倍受青睐,为了深入了解 CdTe 材料的表、界面性质,我们曾利用 LMTO-ASA(Muffin-Tin 轨道线性组合)方法研究了 CdTe(111)清洁表面的价带特性,得到了与同步辐射光电子谱相吻合的结果<sup>[8]</sup>,并结合同步辐射实验结果对 CdTe(111)表面几种可能的表面结构的稳定性作了探讨,得到了与 Wu 等人实验结果相吻合的结论<sup>[9]</sup>.氢原子核外仅有一个电子,用它吸附在 Si 及 III-V 族表面来分析表面态位置及其构成的研究已很多,解释了许多问题,对了解 Si 及 III-V 族化合物的物性起到了一定的作用,但对于 II-VI 族来说这方面研究却很少,本文在文献[9]基础上,利用局域、分波态密度分析技术分析了 CdTe(111)表面两类模型四种表面氢吸附表面电子结构,为研究金属在 CdTe 表面的吸附及与其它半导体或金属的界面电子结构作了准备.

张海峰 男,1967年生,94年10月获得博士学位,主要从事固体电、声子特性的研究  
李永平 男,1945年生,副教授,主要从事固体电子结构和光学研究  
1994年5月26日收到初稿,1994年9月4日收到修改稿

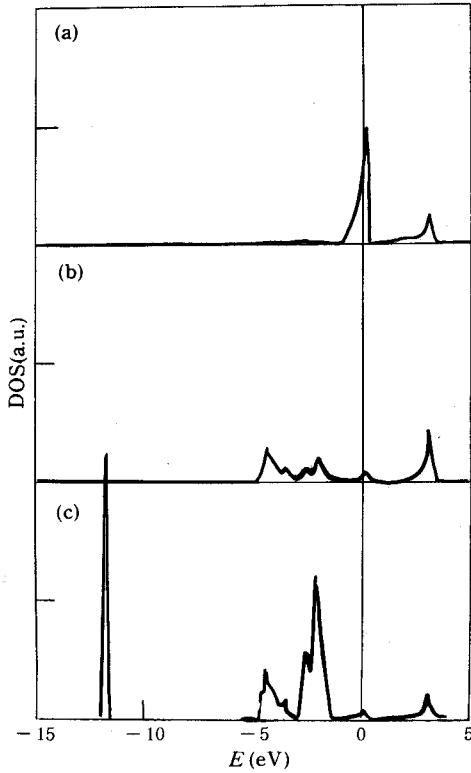


图 1 模型 A Cd 表面 H 吸附局域态密度  
(a) 第 1 层(H)原子 (b) 第 2 层(Cd)原子  
(c) 第 3 层(Te)原子

所谓四类表面的 H 原子吸附是将文献[9]中四类表面分别用 H 原子吸附,吸附位置为原表层原子的位置(这种吸附方式是由实验中碱金属的 CdTe (111)表面吸附得出的),称此种吸附为表面原子的“替位吸附”.为了对比的方便,我们称模型 B 的 Te 表面表层原子 Te 被 H 所替代的情形为模型 A 的 Cd 表面 H 吸附(见文献[9]图 1(a)、(b)),其它情况类似.

图 1(a)、(b)、(c)给出了模型 A 之 Cd 表面 H 吸附时第一层(H)原子,第二层(Cd)原子、第三层(Te)原子的态密度.从图 1(a)可以发现,H 原子态密度仅有两个峰,一个居于费米能级  $E_F$  上,另一个在 3.0eV 处,可见该类表面由于氢原子的吸附体现出了金属性.从图 1(b)可以看出,文献[9]中图 2(a)所讨论的-4.63eV 及-1.21eV 处的占据态表面峰已完全消失,但处于+2.0eV 处未占据共振态仍然存在,不过已移至+3.0eV 处,同时在费米能级  $E_F$  上有一新峰出现,该峰与 H 原子的一峰相对应,是 H 与 Cd 相互作用的体现,除此峰外,其它峰均背向  $E_F$  移动 0.5—1.0eV,表明 Cd、Te 原子的相互作用加强了,这是因为 H 替代一个 Te,而 H 的电负性较 Te 的大<sup>[10]</sup>,使 Cd 向 H 的电荷转移较原来 Cd 向 Te 的电荷转移增大,减小第

二层 Cd 与第三层 Te 间电荷转移,使其向共价键型转化所致.表 1 给出了三类原子的电荷占据情况说明了这一点.最后还应指出在图 1(c)中,费米能级上的态是与 H 原子中相对应的,可见 H 原子的影响已达到了第三层(Te)原子上.从图 1(c)中还可以看出许多与图 1(b)相近似的其它变化特征,其原因在于 Cd 与 Te 是直接成键的原子.正如前面所说 Cd 原子上价电子较少,表面的出现将通过 Cd 影响到与 Cd 直接成键的 Te 的态密度.

图 2(a)、(b)、(c)给出了 B 类模型 Cd 表面 H 吸附后与图 1(a)、(b)、(c)相对应的结果.从图 2(a)可明显地看到 H 原子态密度主要分布于两个较宽区域,-2.8—-1.1eV 及-0.5—1.0eV,且较图 1(a)处于费米能级下的态要多,即 H 原子空态要较前者少.对比图 2(a)、(b),可以看出前者即 H 与第二层 Cd 原子相互结合成键,后者居于费米能级  $E_F$  上,是一个半占据态.

通过将图 2(b)与文献[9]中图 3(a)的对比,很容易地可以看出,处于-2.87eV 处的共振态峰已因与 H 的结合而消失,再次证明了该峰为表面态的结论.对比图 2(b)、(c)与文献[9]中

表 1 各种 Slab 模型中 Cd、Te、H 原子电子平均占据数

模 型		Cd	Te	H
未吸附	A	1.7961	5.446	—
	B	1.506	5.568	—
吸附 H	A Te	1.594	5.473	0.677
	A Cd	1.573	5.803	1.164
	B Te	1.893	5.412	1.389
	B Cd	1.265	6.207	1.401

图 3(a)、(b), 我们可以看出, 除了  $-2.87\text{eV}$  共振峰外, 在态密度分布 (包括峰位和范围) 上有很大的变化, 特别是较图 1 中峰有更大的背离费米能级  $E_F$  移动  $2.5\text{--}3.5\text{eV}$ , 我们知道这就预示着 Cd、Te 原子间的相互作用较另一类 Cd 表面 H 吸附强, 表 1 中电荷占据数也说明了这一点. 比较图 1 和图 2, 我们可以看出, 两对应图无论从态密度峰形, 还是从峰位上都有较大区别, 这主要原因在于 H 原子分别与 Cd 原子有三个键或一个键相连接, 这样将导致第二层 Cd 原子与第三层 Te 原子的电荷转移不同.

对于文献[9]给出的两种模型, 除了 Cd 的 H 吸附外, 还有 Te 的 H 吸附表面. 下面我们将讨论 CdTe(111)Te 的 H 表面电子结构. 从模型 A 的 Te 表面 H 吸附表面电子态密度可以看出, H 与 Te 既有成键峰, 也有反键峰, 一个位于费米能级之下, 一个位于费米能级之上. 这是与上述两种 Cd 的 H 吸附表面不同的. 而体现 Cd-Te 相互作用的峰有向费米能级移动的现象, 这是由于 H 与 Te 原子成键加强, 削弱了 Cd-Te 相互作用所致. 从文献[9]讨论中发现的悬挂键峰  $-0.68\text{eV}$  消失了, 这正是 H 饱和悬挂键所致, 因而又一次证明了 H 对鉴别悬挂键所对应表面态是十分有效的. 模型 B 的 Te 表面 H 吸附结果表现出了与前述三者均不尽相同的结果, 主要表现为 H-Te 相互作用更强, 而 Te-Cd 作用更弱. 这可以由模型 B 中每个 Te 原子与三个 H 原子成键, 而模型 A 只有一个 H 原子与 1 个 Te 原子成键所致.

值得说明的是: 表 1 给出的是在 Slab 模型下 Slab 层内 Cd、Te、H 原子电子平均占据数, 由此可以发现, 在不同条件下, 原子之间电荷转移具有很大区别, 分别体现出了前述讨论的不同的 H-Te, H-Cd, Cd-Te 相互作用特征 (电荷总占据数并不等于总价电子数, 其原因在于空球内也存在电荷, 此处空球内的电荷没有给出).

综合以上结果及讨论, 我们可以得到如下结论: 清洁 CdTe(111) 表面可以根据其表层原子种类及原子所处的环境分为四类表面, 这四类表面分别表现出不同的 H 吸附电子结构特征, 因 H 原子较小, 且仅含有一个价电子, 一般说来 H 吸附对表面总体电子结构影响很小, 但对表面态影响却很大的, 因而用其判断表面态是十分有效的, 本文的研究在一定程度上也说明了这一点, 但是对于本文所述各类表面, H 吸附不仅影响表面态的存在与否, 而且对态密度各峰位置也有一定影响, 特别在 Cd 类表面 H 吸附时, 各谱峰向背离  $E_F$  方向移动, 对 Te 类表面 H 吸附时, A 类 Te 表面使各谱峰位有趋向  $E_F$  处稍小移动外, 对其它态影响不大. 这是与 Cd、Te 原子之间电荷转移数目大小有直接关系的. 由此可见利用 H 原子吸附来配合分层局域分波态密度分析表面态是有效的, 但同时要注意到 H 的吸附位置将不仅影响

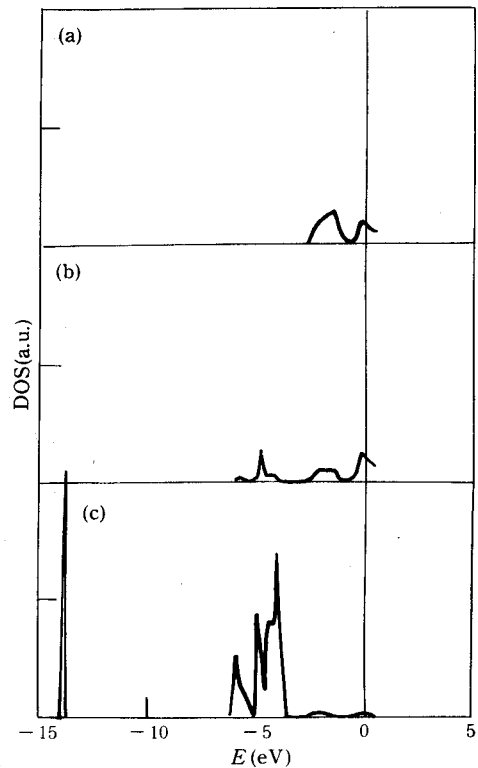


图 2 模型 B Cd 表面 H 吸附局域态密度  
(a) 第 1 层 (H) 原子 (b) 第 2 层 (Cd) 原子  
(c) 第 3 层 (Te) 原子

表面态,而且影响其它态的分布及谱的峰形特征(主要在 Cd 表面 H 吸附时,H、Cd 均易失电子),这种影响在吸附其它种类原子时也将有所体现,这是在进一步研究表面吸附及界面问题时应注意的.

### 参 考 文 献

- [ 1 ] M. A. Haase, J. Qiu *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1991, **59**(1): 1272—1274.
- [ 2 ] Z. Yu, J. Ren *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1992, **61**(11): 1266—1268.
- [ 3 ] J. Britt and C. Ferekides *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1993, **62**(22): 2851—2852.
- [ 4 ] S. Y. Wang, G. Horsburgh *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, 1993, **63**(7): 857—859.
- [ 5 ] N. Mikami, C. Nagao *et al.*, *J. Appl. Phys.* 1991, **69**(1): 433—438.
- [ 6 ] P. M. Young and H. Ehrenreich, *Phys. Rev. B*, 1991, **43**(14): 12057—12059.
- [ 7 ] Hartmut Hochst and David W. Niles, *Phys. Rev. B*, 1991, **40**(12): 8370—8378.
- [ 8 ] 张海峰,李永平,方容川等,物理学报(待发表).
- [ 9 ] 张海峰,李永平,方容川等,物理学报(待发表).
- [ 10 ] 周公度,无机结构化学,北京:科学出版社,1982,第一章.

## Surface Electronic States of CdTe(111) and Electronic Structure of H-Adsorbed CdTe(111)

Zhang Haifeng

(*Department of Material Science and Engineering, University of Science and Technology of China, Hefei 230026*)

Li Yongping and Fang Rongchuan

(*Structure Research Lab., Department of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026*)

Received 26 May 1994, revised manuscript received 4 September 1994

**Abstract** The electronic structure of four models for H-adsorbed surface CdTe(111) are studied by using LMTO-ASA method. The H-adsorbed effects on the electronic structure of CdTe(111) surfaces are systematically analyzed and compared. The results form a foundation for further study on the metal-adsorbed CdTe(111) surface.

**PACC:** 7320